



TITLE:

2. 電子-格子強結合系の理論と A15型化合物におけるマルテンサイ ト変態(名古屋大学理学部物理学教 室,修士論文アブストラクト(1985年 度)追加)

AUTHOR(S):

土井, 一平

CITATION:

土井, 一平. 2. 電子-格子強結合系の理論とA15型化合物におけるマルテンサイト変態(名古屋大学理学部物理学教室,修士論文アブストラクト(1985年度)追加). 物性研究 1986, 47(1): 113-114

ISSUE DATE:

1986-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92321>

RIGHT:

ラスに酸に弱いガラスを混ぜて溶かし、その後、酸で洗ってつくる。

(**) Zeolite

孔径が He 原子程度のきわめて規則正しいネットワーク状の細孔を持つ多孔質結晶である。

2. 電子－格子強結合系の理論と A15 型化合物における マルテンサイト変態

土 井 一 平

A15 型化合物をはじめとする一連の high- T_C , high- T_{C2} 物質は, Anderson-Yu によれば, 電子格子強結合系として位置づけられるが, これらの物質群の特異な物性が, いわゆる Heavy Fermion 系のそれと類似していることが指摘されるようになった。一方, A15 型化合物のうち, Nb_3Sn , V_3Si は低温で Nb, V 一次元鎖上の dimerization を伴う構造相転移 (マルテンサイト変態) を起こすことが知られている。本修士論文では, 電子－格子強結合と Heavy Fermion 系との関係を明らかにした Matsuura-Miyake (M-M)¹⁾ の理論をレビューし, それに基づいてマルテンサイト変態の機構について考察した。

まず M-M 理論を要約しておく。Yu-Anderson²⁾ に従って, 一個の調和振動するイオンと, 縮退した電子ガスが相互作用している系を考える (局所フォノン・モデル)。物理的にはイオンは Nb, V 原子にあたる。簡単のために一次元 (Nb, V 原子一次元鎖方向) のモデルを考え, 電子は spinless fermion とする。 $E_K \gg E_{Ph}$ (E_K , E_{Ph} は原子, フォノンのエネルギー) なる電子をくりこむと, イオンの断熱的ポテンシャルは, 相互作用が十分強いとき, 調和振動子型から double-well 型に変形する (double-well は, マルテンサイト変態の前駆現象であるフォノンのソフト化や弾性率の異方化等の事実と合致する)。低温では擬スピンを導入して, その up, down でイオンが左右の well の底の近傍に局在した状態を表現できる。一方, イオンがどちらかの well に局在すると, 電子もそれに応じて分極するので, その分極ベクトルの二つの向きに応じて, 電子にも擬スピンを割りあてる。M-M は, このようにして擬スピンを導入することにより, 局所フォノン・モデルを擬スピン系に翻訳できることを示した。この擬スピン系は, Vlodar-Zawadowski³⁾ の二準位系と同形であり, 彼らのスケーリングの議論を適用すると, M-M の擬スピン系は低温で, 等方的反強磁性 s-d モデルに移行する。M-M は

一般にイオンが格子をなしているときにも、低温で近藤格子系、或いは、周期的 Anderson モデルによる記述が可能であると考え、これらの系で出現する Heavy-Fermion という観点から電子-格子強結合系が理解できると考えた。

さて、イオンの電荷密度波として出現するマルテンサイト変態は、上記の擬スピン系では、イオンの擬スピンの反強磁性秩序にあたる。この反強磁性の原因としてまず考えられるのは、イオン擬スピン間の“RKKY相互作用”であろう。これに対し低温では各サイト上でいわゆる近藤一重項状態が安定化する。一重項状態ではイオン擬スピンのup, down 成分が等しく重じょうしており、イオンは平均として変位しない。両者の競合が問題となるが、どちらが卓越するかは物質によるものと思われる。大部分の A15 型化合物でマルテンサイト変態が出現しないことを考えると、これらの系では各サイトでの一重項状態が卓越し、サイト間コヒーレンスによって Heavy-Fermion が出現しているものと考えられる。Nb₃Sn, V₃Si のみで、両者が共存しているものと思われるが、反強磁性と Heavy-Fermion の共存という問題であり、はっきりとしたことはいえない。RKKY相互作用が卓越すれば、イオンは大きく変位することになり、おそらくは結晶の不安定性をもたらすであろう。この点はいくつかの A15 型化合物が結晶として不安定であることと関連があるものと思われる。Fermi 面効果としての一重項状態の形成がマルテンサイト変態を抑え、A15 型構造の安定化に有利に働いていることは注目に値する。一重項状態ではイオンは両側の well に等確率に存在するので double-well の揺がりが Debye-Waller 因子として観測できるであろう。一重項状態は Fermi 面効果によるものなので絶対零度でもこの因子は消失しないと考えられる。

References

- 1) T. Matsuura and K. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, (1986), No1.
- 2) C. C. Yu and P. W. Anderson, P. R. **B 29**, (1984), 6165.
- 3) K. Vladár and A. Zawadowski, P. R. **B 28**, (1983), 1564.